



ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

В 2016 г. Лабораторией информационных технологий (ЛИТ) в рамках направления «Сети, компьютеринг, вычислительная физика» проводились исследования по двум темам первого приоритета: «Информационно-вычислительная инфраструктура ОИЯИ» и «Методы, алгоритмы и программное обеспечение для моделирования физических систем, математической обработки и анализа экспериментальных данных». В рамках взаимодействия с другими лабораториями ОИЯИ сотрудники ЛИТ принимали участие в исследованиях по 30 темам Проблемно-тематического плана научно-исследовательских работ. Деятельность ЛИТ направлена на развитие сетевой, информационно-вычислительной инфраструктуры, математическое и программное обеспечение научно-производственной деятельности Института и стран-участниц ОИЯИ на базе современных информационных и вычислительных технологий.

На протяжении последнего десятилетия развитие информационно-вычислительной инфраструктуры ОИЯИ, созданной в ЛИТ, осуществлялось на базе Центрального информационно-вычислительного комплекса (ЦИВК) ОИЯИ. В последние несколько лет в связи с работами по организации вычислительного проекта для NICA, вводу в эксплуатацию центра уровня Tier-1 для эксперимента CMS, реализации облачной структуры и кластера для гибридных вычислений в информационно-вычислительной среде ОИЯИ сформировался ряд самостоятельных структур, которые имеют общую инженерную инфраструктуру. Таким образом, можно определить эту структуру как многофункциональный информационно-вычислительный комплекс (МИВК)

ОИЯИ, который в настоящее время включает в себя следующие основные компоненты:

- ЦИВК ОИЯИ с построенными в лаборатории вычислительными элементами и системами массовой памяти;
- грид-систему уровня Tier-1 для эксперимента CMS;
- грид-систему уровня Tier-2 для поддержки экспериментов на LHC и других масштабных экспериментов и проектов в рамках всемирной грид-инфраструктуры;
- гетерогенный кластер «HybriLIT» для параллельных вычислений;
- облачную инфраструктуру;
- образовательную и научно-исследовательскую грид-облачную инфраструктуру.

ЦИВК ОИЯИ предоставляет ресурсы, необходимые для решения различных задач в рамках многочисленных проектов, в реализации которых ученые из ОИЯИ принимают активное участие: COMPASS, BES-III, DIRAC, HARP, CMS, ALICE, ATLAS, H1, NEMO, OPERA, PANDA, NOVA, STAR, LHCb и др. Грид-сайты ОИЯИ уровней Tier-1 и Tier-2 являются элементами российского сегмента всемирной грид-инфраструктуры, используемой для компьютеринга на LHC и других грид-приложений. Грид-инфраструктура ОИЯИ представлена центром уровней Tier-1 и Tier-2 для экспериментов ALICE, ATLAS, LHCb и CMS.

В 2016 г. сотрудники ЛИТ опубликовали 193 научные работы в реферируемых научных изданиях, представили 47 докладов на международных и российских конференциях.

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ИНФРАСТРУКТУРА ОИЯИ

В 2016 г. продолжены работы, связанные с развитием и обеспечением надежного функционирования сетевой и информационно-вычислительной инфраструктуры ОИЯИ. Основные элементы этой инфра-

структуры — телекоммуникационные каналы связи, локальная вычислительная сеть (ЛВС), вычислительный комплекс и базовое программное обеспечение, в том числе на основе облачных, грид- и гибрид-

ных технологий, объединяющие информационно-вычислительные ресурсы Института в единую, доступную для всех пользователей среду.

Телекоммуникационные каналы связи ОИЯИ. В 2016 г. поддерживалась надежная работа высокоскоростного канала связи Дубна–Москва. Для связи с научными сетями и сетью Интернет использовались следующие каналы связи: LHCOPN/ЦЕРН (10 Гбит/с), RBnet (10 Гбит/с), e-Agema и российские научные сети (10 Гбит/с), RUNet и международные научные сети (10 Гбит/с). Пропускная способность резервного канала связи составила 10 Гбит/с, и его надежность была улучшена за счет внедрения дополнительного маршрутизатора Cisco7606-S. Проработана возможность плавной модернизации внешнего канала до скорости 100 Гбит/с. Эта работа была завершена к концу 2016 г. Для модернизации было приобретено и запущено в эксплуатацию новое оборудование Transmode.

Распределение входящего и исходящего трафиков по подразделениям ОИЯИ в 2016 г. (превышающий по входящему трафику 3 Тбайта) приведено в табл. 1.

Таблица 1

Подразделение	Входящий трафик, Тбайт	Исходящий трафик, Тбайт
Лаборатория ядерных проблем	125,98	154,99
Лаборатория физики высоких энергий	102,43	90,68
Серверы общего доступа	90,99	17,72
Лаборатория информационных технологий	62,13	34,79
Лаборатория нейтронной физики	49,20	63,15
Гостинично-ресторанный комплекс	25,47	4,4
Лаборатория ядерных реакций	37,60	18,18
Лаборатория теоретической физики	19,71	16,73
Управление ОИЯИ	26,82	58,20
Узел удаленного доступа	24,05	5,74
Университет «Дубна»	48,98	38,43
Профилакторий «Рагмино»	7,77	2,08
ОАО «НПК Дедал»	10,78	5,97
МСЧ-9	10,65	0,82
Лаборатория радиационной биологии	8,76	5,26
ООО «НПО Атом»	5,13	0,65
Служба материально-технического снабжения	4,23	3,07
Службы главного инженера ОИЯИ	3,83	0,68

Общий входящий трафик ОИЯИ, включая серверы общего назначения, Tier-1, Tier-2 и вычислительный комплекс, составил в 2016 г. 14,2 Пбайт (4,3 Пбайт в 2015 г.). Процентное распределение входящего трафика по категориям приведено в табл. 2.

Локальная вычислительная сеть ОИЯИ. В 2016 г. были продолжены работы по развитию и совершенствованию сетевых компонентов ИТ-структуры ОИЯИ, направленные на повышение эффективности работы сотрудников Института.

Завершена работа по внедрению 10-гигабитной магистрали в локальной сети лабораторий ОИЯИ.

В рамках поддержки пользовательской компьютерной среды произведены плановые работы по усовершенствованию IPDB, mail, webmail, проху, e-lib и сервисов авторизации. Так, запущена работа по переходу подразделений ОИЯИ на единую общеинститутскую почтовую службу user@jinr.ru, на площадках ОИЯИ начал функционировать авторизованный Wi-Fi, а также сервисы eduoam и VPN для работы в удаленном режиме за пределами сети Института. Подготовлены и утверждены новые правила работы пользователей в сети ОИЯИ.

ЛВС ОИЯИ содержит 8222 сетевых элемента и 13 364 IP-адреса. На 2016 г. зарегистрированы 4301 пользователь сети, 2341 пользователь сервиса mail.jinr.ru, 1500 пользователей электронных библиотек и 371 пользователь сервиса удаленного доступа.

Грид-среда ОИЯИ. В 2015 г. запущен в эксплуатацию центр уровня Tier-1 для эксперимента CMS на ЛНС. На конец 2016 г. ресурсы центра уровня Tier-1 в ОИЯИ следующие: вычислительная мощность 55,16 kHS06, 3600 ядер/слотов (11 SuperMicro Twin Blades), дисковое хранилище емкостью 4037 Тбайт (серверы с 30 дисками с использованием RAID6-технологии) и 521,88 Тбайт, используемые в качестве буфера для ленточной системы хранения данных (серверы с 8 дисками с использованием RAID6-технологии), объем ленточной памяти 5478,32 Тбайт (ленточная библиотека TS3500 IBM с соединениями 8 × FC8 с 8-дисковыми серверами). Для связи, совместно с НИЦ «Курчатовский институт», сконфигурирована внешняя наложенная сеть LHCOPN (ОИЯИ–ЦЕРН), проходящая через МГТС-9 в Москве, Будапешт, Амстердам, для связи центров Tier-0 (ЦЕРН) и Tier-1 (ОИЯИ). В то же время внешняя наложенная сеть LHCONE, проходящая таким же маршрутом, предназначена для системы Tier-2 ОИЯИ.

Системы массовой памяти построены на программном обеспечении dCache и Enstore в качестве буфера для работы с ленточным роботом. Эти две системы хранения имеют 4,0 Пбайт эффективного дискового пространства, а ленточный робот —

Таблица 2

Научно-образовательные сети	Файлообмен (p2p)	Веб-ресурсы	Социальные сети	Программное обеспечение
96,75 %	2,32 %	0,53 %	0,11 %	0,29 %

5,4 Пбайт для хранения данных. Для обеспечения хранения и доступа к данным установлены 8 физических и 14 виртуальных машин.

Программное обеспечение Torque/Maui используется в качестве менеджера ресурсов планировщика задач. Для вычислений используется стандартный программный стек проекта WLCG: 2 × CREAM, 4 × ARGUS, BDI top, BDI site, APEL parsers, APEL publisher, EMI-UI, 220 × EMI-WN + gLExec-wn, 4 × FTS3, LFC, WMS, L&B, glite-proxynewal.

Центр уровня Tier-1 для CMS в ОИЯИ продемонстрировал стабильную работу в течение всего периода после его запуска в работу в полном объеме [1]. В течение всего 2016 г. этот центр выполнил 8 257 163 задачи, нормированное время ЦПУ составило 237 346 520 ч в единицах HEPSpec06. На рис. 1 представлен вклад мировых центров уровня Tier-1 в обработку экспериментальных данных CMS (в миллионах обработанных событий) за 2016 г. Сайт ОИЯИ занимает одно из ведущих мест в мире по своей производительности.

На рис. 2 показано количество событий, обработанных в ОИЯИ в центре уровня Tier-1 CMS в июне 2016 г. по разным типам потоковой обработки дан-

ных (реконструкция, моделирование, повторная обработка, анализ и т. д.).

Одна из основных функций центров уровня Tier-1 — организация архивного хранения сырых экспериментальных и моделированных данных. На рис. 3 показана загрузка ленточного робота в 2016 г. На рис. 4 представлены запросы от центров Tier-1 и Tier-2 в Tier-1 для CMS в ОИЯИ в июне. Средняя скорость передачи сырых данных в Tier-1 для CMS в ОИЯИ составляет 250–300 Мбайт/с, более 1 Тбайт/ч.

Центр уровня Tier-2 в ОИЯИ поддерживает целый ряд виртуальных организаций (ВО), в частности: ALICE, ATLAS, BES, BIOMED, COMPASS, CMS, HONE, FUSION, LHCb, MPD, NOVA, STAR. Вычислительные ресурсы центра Tier-2 составляют 2470 ядер/слотов, производительность — 46,72 kHS06, объем дискового пространства — 587,46 Тбайт для ALICE, 641,87 Тбайт для ATLAS, 659,31 Тбайт для CMS.

Продолжается работа над интеграцией вычислительного элемента OSG HT-CONDOR в инфраструктуру центра уровня Tier-2. Сейчас он используется в основном для ВО STAR, но в будущем его можно будет использовать для поддержки и других ВО.

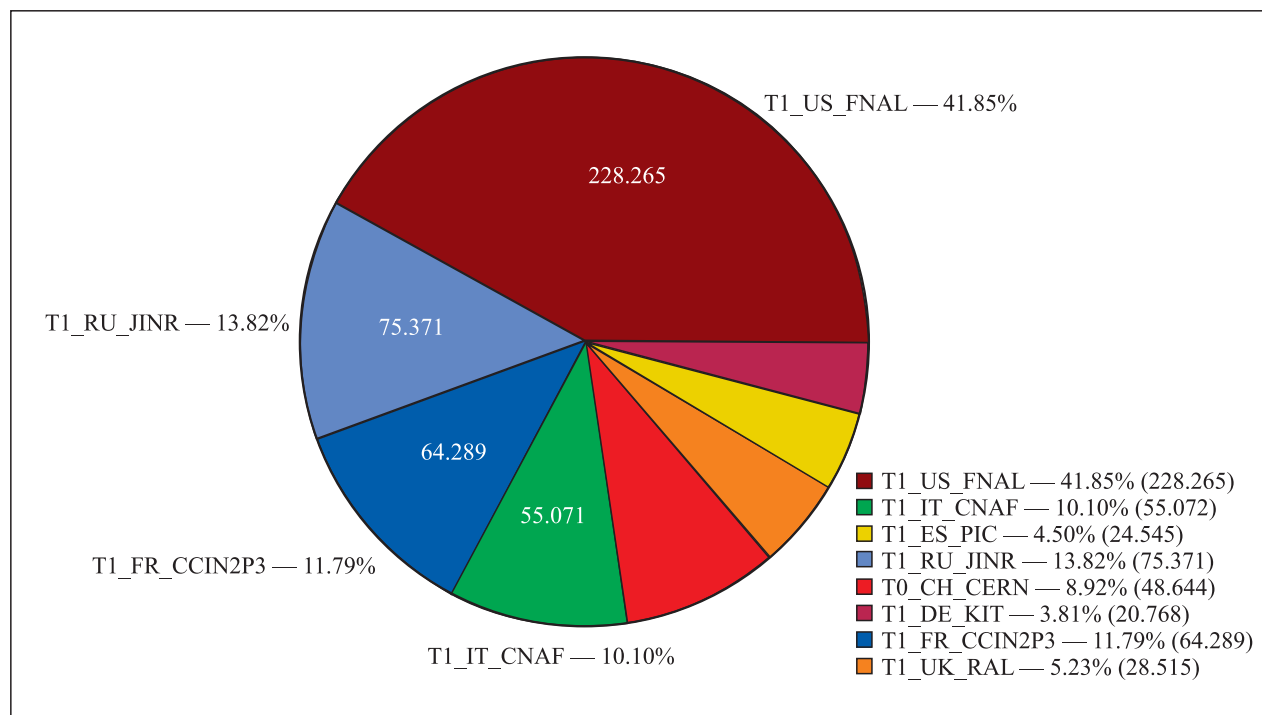


Рис. 1. Количество событий, обработанных для CMS Tier-1 (в миллионах событий) за 2016 г.

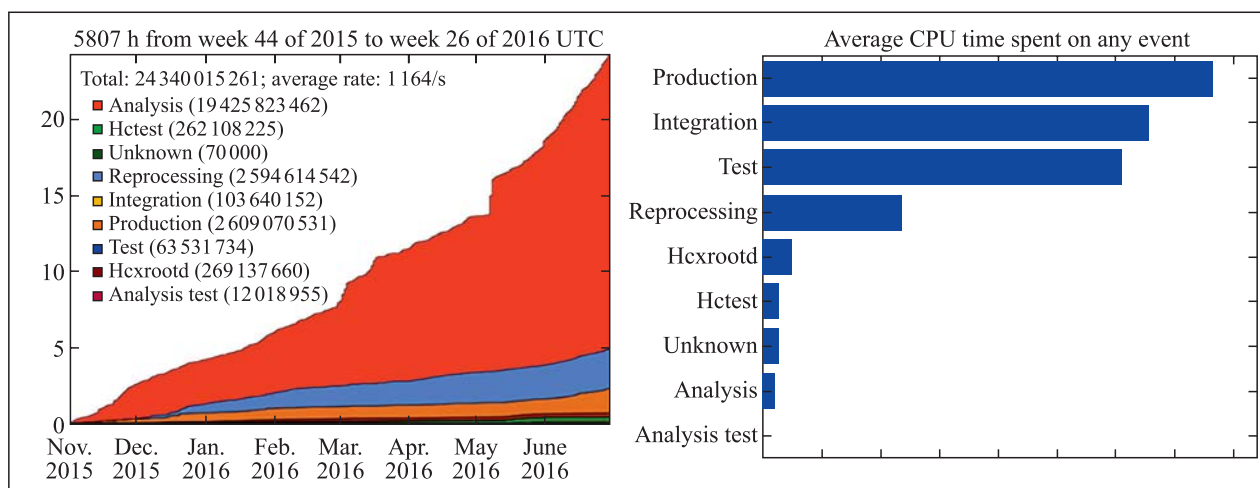


Рис. 2. Количество событий, обработанных в ОИЯИ в центре уровня Tier-1 CMS в июне 2016 г. (реконструкция, моделирование, повторная обработка, анализ и т. д.)

Основными пользователями грид-ресурсов ОИЯИ являются ВО всех экспериментов на LHC [2]. В 2016 г. на сайте Tier-2 выполнено 4 185 956 задач (3 912 779 из них для LHC), время ЦПУ составило 186 711 011 ч в единицах NEPSpec06. На рис. 5 приведены данные по использованию сайта Tier-2 (JINR-LCG2) в ОИЯИ виртуальными организациями в рамках проектов RDIG/WLCG/EGI в 2016 г.

Платформа PanDA, предназначенная для управления задачами в распределенной вычислительной среде, была создана в 2005 г. для эксперимента ATLAS. С тех пор система росла и развивалась, и в 2013 г. стартовал проект BigPanDA, цель которого — подготовить платформу PanDA для использования за пределами экспериментов LHC. Одним из таких экспериментов, где применяется PanDA, является эксперимент COMPASS в ЦЕРН. В 2016 г. ОИЯИ как вычислительный сайт для эксперимента COMPASS был подключен через PanDA, т.е. в вычислительной инфраструктуре ОИЯИ было выделено пространство и создана PanDA-очередь. Создание PanDA-очереди в других участву-

ющих в эксперименте COMPASS институтах делает анализ экспериментальных данных распределенным [3].

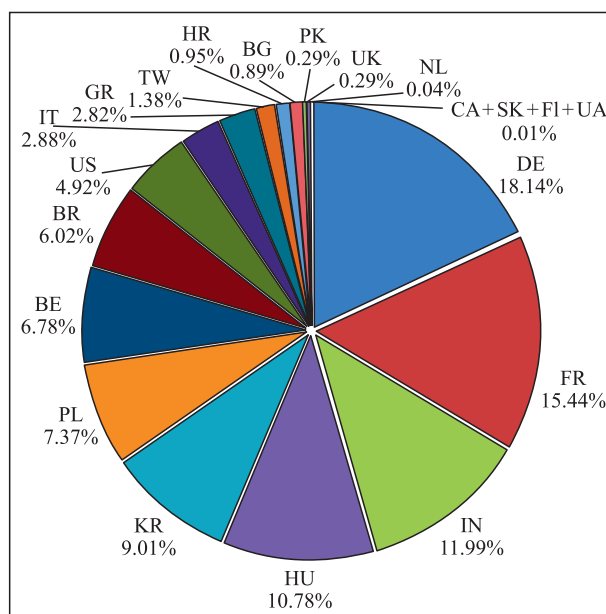


Рис. 4. Запросы от центров Tier-1 и Tier-2 к центру уровня Tier-1 для CMS в ОИЯИ по данным в июне 2016 г.

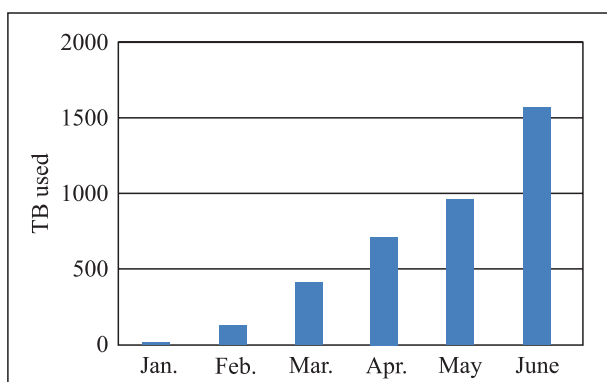


Рис. 3. Загрузка ленточного робота центра уровня Tier-1 для CMS в ОИЯИ

В ЛИТ работает система мониторинга МИВК ОИЯИ и создан центр контроля и управления работой комплекса. Для надежного функционирования всего вычислительного комплекса необходимо в реальном режиме времени отслеживать состояние всех узлов комплекса. Система позволяет контролировать функционирование системы, визуализировать состояние вычислительного комплекса и посылать оповещение о сбоях (рис. 6).

Система мониторинга HarryFace установлена и сконфигурирована для центра Tier-1 для CMS в

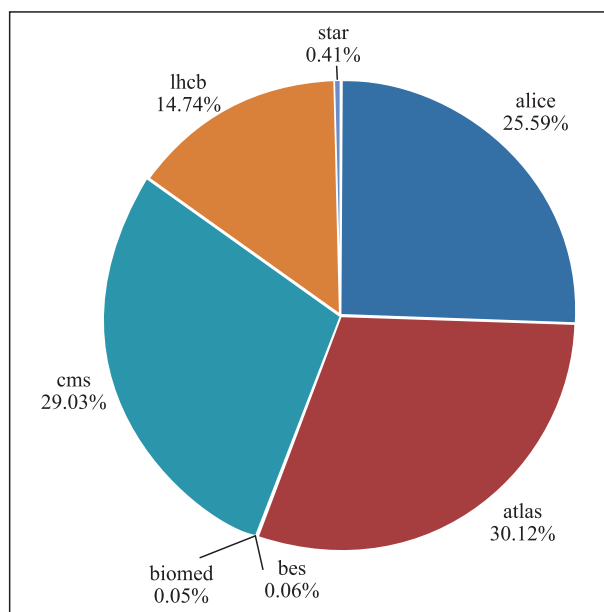


Рис. 5. Использование грид-сайта JINR-LCG2 в ОИЯИ виртуальными организациями, входящими в RDIG/WLCG/EGI



Рис. 6. Экран (Video Wall) мониторинговой системы HappyFace в центре контроля работы комплекса

ОИЯИ. Данный программный продукт является разработкой КИТ для мониторинга грид-сайтов экспериментов CMS и ATLAS, а сейчас это один из ключевых элементов мониторинговых сервисов Tier-1 в ОИЯИ (<http://happyface.jinr.ru>).

Начата разработка новой системы мониторинга Tier-1 для CMS в ОИЯИ. Эта система имеет модульную структуру. Разработаны следующие модули: Job Status — для определения числа выполненных и аварийно закончившихся задач; SSB Status — для отображения результатов мониторинга, проводимого системой Dashboard в ЦЕРН; PhedexQuality — для отображения качества передач между другими грид-сайтами и сайтом Tier-1 для CMS в ОИЯИ; PhedexErrors — для определения ошибок, связанных с Tier-1 для CMS в ОИЯИ. Тестовая версия

этой системы мониторинга запущена и доступна на lcsens01o.jinr.ru. Теперь система собирает и отображает на своей веб-странице данные по мониторингу Phedex, dCache, а также мониторинг WLCG [4]. Система развивается как инструмент общего назначения, который может быть адаптирован для других центров уровня Tier-1 и экспериментов.

Высокопроизводительная система вычислений. Многофункциональный информационно-вычислительный комплекс в ЛИТ обеспечивает проведение пользователями вычислений, в том числе параллельных, вне рамок грид-среды. Это необходимо как экспериментальным группам NOVA, PANDA, BES, NICA/MPD и др., так и локальным пользователям из лабораторий ОИЯИ. Все вычислительные мощности доступны как пользователям ОИЯИ, так и

пользователям грид-среды через единую систему пакетной обработки заданий. На рис. 7 приведено распределение по времени задач, выполненных на вычислительном кластере подразделениями Института и группами пользователей. Основным пользователем этих ресурсов является NICA/MPD (61,07 % астрономического и 55,53 % процессорного времени).

Системы хранения и доступа к данным dCache и XROOTD обеспечивают работу с данными как для локальных пользователей ОИЯИ, так и для внешних пользователей. Поддерживаются две инсталляции dCache: dCache-1 — для экспериментов CMS и ATLAS; dCache-2 — для локальных пользователей, групп пользователей и международных проектов NICA/MPD, HONE, FUSION, BIOMED, COMPASS. Две инсталляции системы доступа к данным XROOTD поддерживают работу с данными трех международных коллабораций ALICE, PANDA и CBM. Все системы хранения построены с использованием аппаратного механизма защиты данных RAID6.

В 2016 г. создана новая система моделирования грид- и облачных сервисов для современных экспериментов в области физики высоких энергий, объединяющая в себе мониторинг, анализ его результатов и собственно моделирование. Объектами моделирования являются вычислительные комплексы, предназначенные для обработки информации. Эта система предназначена для повышения эффективности проектирования и разработки широкого класса грид- и облачных структур с использованием показателей индикаторов работы некоторой реальной системы. Такой подход позволяет построить типовую структуру модели, которая не зависит от спе-

цифики моделируемого объекта, и при этом параметры, описывающие этот объект, могут быть использованы в качестве входных данных для запуска модели. Разработка такого рода программного обеспечения очень важна для создания новой грид-облачной инфраструктуры для таких крупных научных экспериментов, как NICA–MPD–SPD и Tier-0–Tier-1 распределенного компьютеринга [5, 6]. Программа моделирования SyMSim (Synthesis of Monitoring and SIMulation) позволяет облегчить принятие решения для правильного выбора архитектуры вычислительной системы эксперимента VM@N [7].

Гетерогенный вычислительный кластер HybriLIT. В течение 2016 г. общая производительность кластера HybriLIT возросла в 1,8 раза. В настоящее время вычислительный компонент кластера содержит четыре узла с графическими процессорами NVIDIA Tesla K80 и четыре узла с ускорителями NVIDIA Tesla K40, один узел с сопроцессорами Intel Xeon Phi 7120P, а также узел с двумя типами ускорителей вычислений NVIDIA Tesla K20x и Intel Xeon Phi 5110P. Все узлы имеют по два многоядерных процессора Intel Xeon. В целом кластер содержит 252 CPU-ядра, 77 184 GPU-ядра, 182 PHI-ядра, имеет 2,5 TB RAM и 57 TB HDD, а общая производительность составляет 142 Тфлопс для операций с одинарной точностью и 50 Тфлопс для операций с двойной точностью.

В 2016 г. в состав кластера введен новый компонент — система виртуальных рабочих столов для поддержки работы пользователей с пакетами прикладных программ. Развернут полигон из восьми серверов, на котором на базе KVM (Kernel-based Virtual Machine) созданы виртуальные рабочие столы с

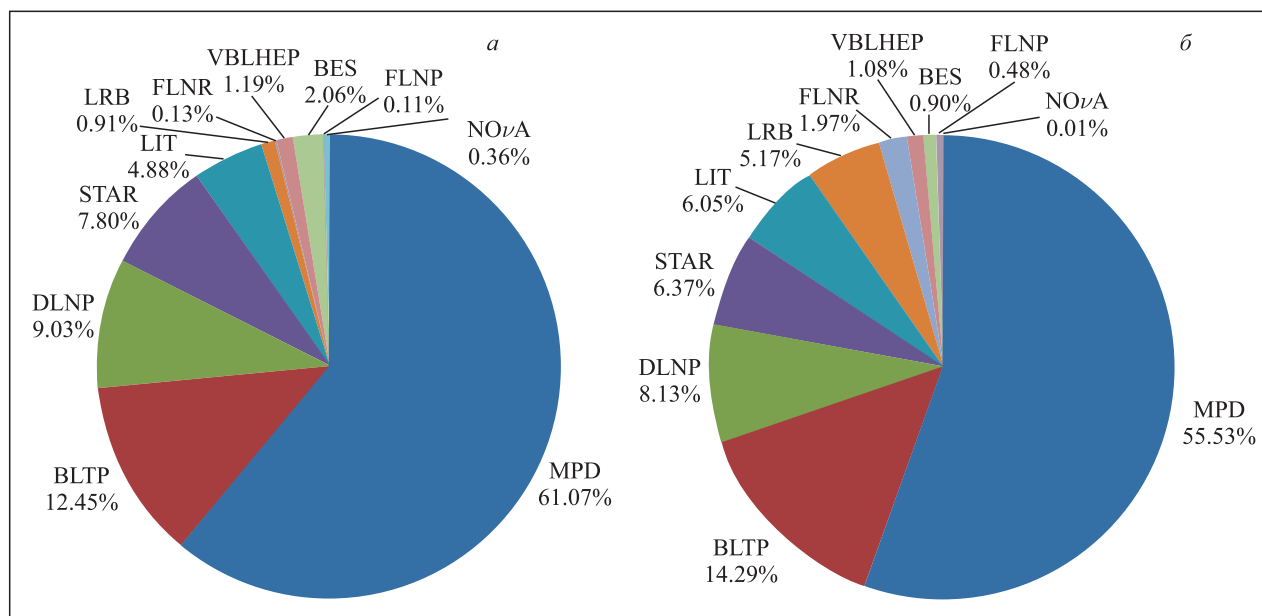


Рис. 7. Статистика использования астрономического (а) и процессорного (б) времени вычислительного кластера подразделениями и в экспериментах ОИЯИ без учета пользователей грид-среды

удаленным доступом к пакету COMSOL Multiphysics для группы пользователей. Развиваемый новый компонент кластера позволяет пользователям эффективно использовать ресурсы кластера и проводить ресурсоемкие расчеты из пакетов прикладных программ на вычислительных узлах кластера (рис. 8).

В течение 2016 г. активно поддерживалась и развивалась программно-информационная среда кластера, позволяющая пользователям разрабатывать программные приложения, проводить расчеты с использованием новейших вычислительных архитектур. Общее количество пользователей составляет 450 человек из лабораторий ОИЯИ и стран-участниц. В частности, ресурсы кластера используются для проведения расчетов в области квантовой хромодинамики, квантовой механики и молекулярной динамики, на кластере установлено программное обеспечение PandaRoot, MpdRoot для проведения расчетов в области физики высоких энергий.

Гетерогенный кластер HybriLIT используется не только для проведения массивно-параллельных расчетов, но и для обучения использованию пакетов прикладных программ и технологиям параллельного программирования. В течение 2016 г. проведено свыше 20 учебных курсов, в которых приняли участие более 200 человек из различных подразделений Института, молодых ученых из стран-участниц и университетов России. Учебные курсы были проведены по использованию пакетов прикладных программ MCTDHB-Lab, LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator), VMD (Visual Molecular Dynamics) и по технологиям параллельного программирования CUDA, OpenMP, OpenCL, MPI. Учебные курсы и мастер-классы были проведены в рамках 7-й Международной конференции «Распределенные вычисления и грид-технологии в науке и образовании»

(GRID'2016) и школы ОИЯИ–ЦЕРН «Грид и современные административно-управленческие системы».

Облачная среда. В течение 2016 г. облачная инфраструктура ОИЯИ [8] развивалась по следующим основным направлениям: увеличение количества ресурсов, доступных пользователям; увеличение количества решаемых задач; реализация сбора и визуализации статистики использования облачных ресурсов на базе программного обеспечения (ПО) InfluxDB и Grafana. Общее количество ресурсов, доступных пользователям облака ОИЯИ, было увеличено как за счет добавления дополнительных серверов в качестве рабочих узлов, так и за счет интеграции части облачных вычислительных ресурсов организаций-партнеров.

К настоящему времени общее количество ядер центрального процессорного устройства в облаке ОИЯИ, доступное его пользователям, равно 330 (в 2015 г. — 200) и общий объем ОЗУ равен 840 Гбайт (в 2015 г. — 400 Гбайт).

Спектр решаемых задач на облачных ресурсах ОИЯИ также увеличился в 2016 г. Для этого на данной инфраструктуре установлены следующие компоненты:

- полигон PanDA (для развития ПО PanDA и использования его для решения задач экспериментов ATLAS и COMPASS);
- полигон на базе промежуточного программного обеспечения (ППО) DIRAC (используется для разработки средств мониторинга распределенной вычислительной инфраструктуры эксперимента BES-III, а также как один из его вычислительных ресурсов);
- набор контейнеров для пользователей-участников эксперимента NOVA;
- полигон для изучения и оценки ППО для построения вычислительной инфраструктуры экспериментов на ускорителе NICA;

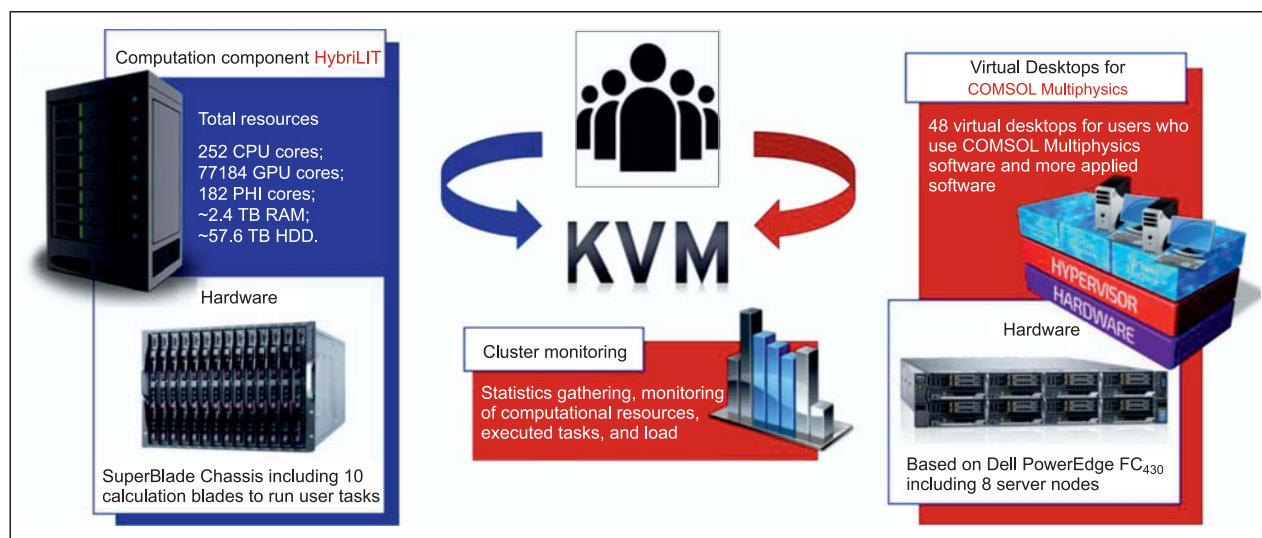


Рис. 8. Новый компонент кластера для работы с пакетами прикладных программ

- полигон на базе системы хранения данных EOS для выполнения обязательств в рамках участия в проекте по исследованию гетерогенных киберинфраструктур, разработки и создания прототипа компьютерной федерации на основе высокоскоростных вычислений, облачных вычислений и суперкомпьютеров для хранения, обработки и анализа больших данных;

- сервер Spark для машинного обучения и анализа больших данных.

Одно из важных направлений развития облачных технологий в настоящее время — разработка методов интеграции различных облачных инфраструктур [9]. Для объединения облачных ресурсов организаций-партнеров из стран-участниц ОИЯИ с целью решения совместных задач, а также для распределения пиковых нагрузок по интегрированным ресурсам командой сотрудников ЛИТ разработан специальный драйвер. Он позволяет объединять ресурсы партнерских организаций как развернутые в облаке на базе OpenNebula, так и других облачных платформ, которые поддерживают ОССІ-интерфейс (Open Cloud Computing Interface). С облаком ОИЯИ интегрированы облака Института физики Национальной академии наук Азербайджана (Баку), Института теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова Национальной академии наук Украины (Киев), Российского экономического университета им. Г. В. Плеханова (Москва). На рис. 9 представлено местоположение партнерских организаций из стран-участниц ОИЯИ, чьи облачные ресурсы интегрированы с облаком ОИЯИ.

Кроме того, облако ОИЯИ интегрировано в Федеративное облако Европейской грид-инфраструктуры (ЕГИ), поэтому возможно взаимное использование облачных ресурсов ОИЯИ и ЕГИ.

Одно из направлений развития облачной инфраструктуры ОИЯИ в 2016 г. — реализация сбора и визуализации статистики использования облачных ресурсов. Ранее данный функционал был реализован сотрудниками ЛИТ как дополнительный пункт меню графического веб-интерфейса платформы OpenNebula, который называется Sunstone. Однако недостатком такой реализации была необходимость проверки совместимости данного модуля сбора статистики и ее визуализации с новыми версиями платформы OpenNebula и ее веб-интерфейса, так как последний мог измениться и в этом случае возникала необходимость адаптации кода модуля под новый веб-интерфейс. Во избежание подобных дополнительных усилий перед обновлением ПО облачной платформы, а также с целью сохранения собираемых метрик о потребляемых ресурсах в базе данных для их последующей визуализации и анализа на предмет их изменений в течение задаваемого промежутка времени было решено реализовать сбор и визуализацию статистических данных об использовании ресурсов облака ОИЯИ с помощью таких инструментов, как InfluxDB и Grafana [10].

Информационная и программная поддержка.

В 2016 г. в ЛИТ продолжалась традиционная работа по сопровождению и развитию библиотеки программ JINRLIB, а также осуществлялась поддержка библиотек программ, разработанных другими научно-исследовательскими центрами и организациями (CERNLIB, CPC Program Library). Обновлен сайт JINRLIB. В специальный раздел для параллельных программ добавлены образовательные программы по параллельному программированию (MPI). В библиотеку программ JINRLIB также вошел программный пакет H-Utils, разработанный сотрудниками ЛИТ специально для кластера гетерогенных

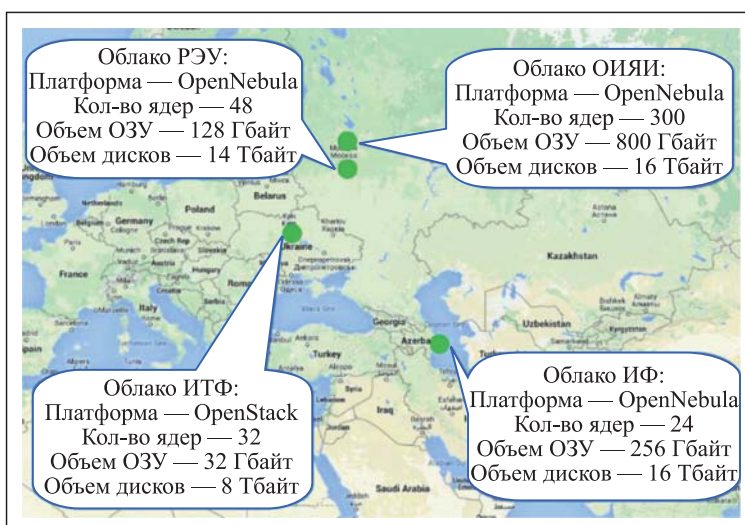


Рис. 9. Географическое положение облачных инфраструктур организаций из стран-участниц ОИЯИ, предоставляющих часть своих ресурсов для интеграции с облаком ОИЯИ

вычислений HybriLIT (<http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/h-utils/index.html>). Этот пакет призван облегчить разработку программных комплексов для решения задач в области физики, химии, биологии и др. на высокопроизводительных вычислительных платформах.

В 2016 г. в рамках разработки комплекса корпоративных информационных систем ОИЯИ [11] разработана и введена в эксплуатацию подсистема электронного согласования приказов в структуре системы «База документов ОИЯИ», реализован универсальный шлюз обмена данными между различными подсистемами КИС (1С, СЭД, ADB2, ИСС, PIN), расширены функциональные возможности информационной системы управления проектом NICA

на базе системы ADB — созданы функционалы по формированию Cost Book по проекту NICA и по формированию различных сводных отчетов по проекту [12]. Продолжалось развитие единой системы 1С 8.2 УПП, а также осуществлялась регулярная поддержка конечных пользователей этой системы.

В 2016 г. продолжено совершенствование программного обеспечения системы JINR Document Server (JDS), а именно разработаны средства, обеспечивающие ускорение внесения данных, повышение качества контента и эффективного повторного использования данных. Работы ведутся на тестовом сервере jds-test3 (<http://jds-test3.jinr.ru>), развернутом в облачной инфраструктуре ЛИТ ОИЯИ.

МЕТОДЫ, АЛГОРИТМЫ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ, МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ И АНАЛИЗА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Одно из основных направлений деятельности ЛИТ — обеспечение математической алгоритмической и программной поддержки экспериментальных и теоретических исследований, проводимых в ОИЯИ. Ниже приведена краткая информация о некоторых из полученных результатов.

Предложен новый алгоритм поиска треков-кандидатов для реконструкции событий в эксперименте VM@N (Baryonic Matter at Nuclotron). Реконструкция событий — это одна из наиболее важных задач по обработке экспериментальных данных физики высоких энергий. Она состоит из поиска треков и оценки их параметров в трековых детекторах эксперимента, что требует огромного числа переборов всех хитов (реконструированных откликов детектора), чтобы найти те из них, которые принадлежат одному треку. Предложено новое координатное преобразование, переводящее экспериментальные данные в пространство нормированных координат, в котором хиты, соответствующие одному треку, группируются в компактные горизонтальные отрезки. Для оценки параметров найденные треки-кандидаты аппроксимируются спиралями Архимеда. Ввиду компактности данных в пространстве нормированных координат предложенный алгоритм может быть эффективно распараллелен на современных вычислительных архитектурах [13].

Разработана программа глауберовских расчетов для экспериментов на NICA. Следует отметить, что все современные эксперименты с пучками релятивистских ядер (RHIC, LHC, NICA, CBM) используют и будут использовать различные методы определения геометрических характеристик взаимодействий, в частности прицельного параметра соударе-

ний. Прицельный параметр не может быть измерен прямо, поэтому экспериментально наблюдаемые величины связываются тем или иным способом с геометрическими характеристиками, рассчитанными в глауберовском приближении. Однако существующие методы глауберовских расчетов не отвечают современным требованиям. Согласно расчетам, проведенным по новой программе, геометрические характеристики взаимодействий ядер золота с ядрами золота при энергиях RHIC и NICA (5–10 ГэВ в системе центра масс NN -соударений) отличаются не более чем на 5–7%. Поэтому возможные изменения физических характеристик соударений на NICA могут быть связаны с изменениями физики взаимодействий [14].

Разработан новый алгоритм реконструкции треков-сегментов в катодно-стриповых камерах. Получены результаты сравнения работы стандартного и нового алгоритмов для различных типов симулированных данных. С использованием нового алгоритма треков-сегментов реконструируются с большей точностью и эффективностью, особенно в условиях высокой светимости на Большом адронном коллайдере и при больших поперечных импульсах частиц, проходящих через торцевую часть мюонной системы. Алгоритм включен в официальный пакет реконструкции эксперимента CMS в июле [15].

Рассмотрена модель Намбу–Иона–Лазинио с пеллей Полякова в присутствии векторного взаимодействия и с дополнительной связью между кварковым и калибровочным секторами. Изучено влияние данных взаимодействий на фазовую структуру КХД: киральный фазовый переход первого рода, возникающий при конечном химическом потенциале, и связанная

с ним критическая конечная точка исчезают при достаточно высоких значениях константы векторного взаимодействия G_v . Присутствие дополнительной связи между кварками и глюонами приводит к росту критического значения константы векторного взаимодействия G_v , при котором в термодинамической системе происходит исчезновение фазового перехода первого рода. Показано, что векторное взаимодействие влияет на кривизну линии фазового перехода типа «кроссовер» в плоскости $T-\mu$ вблизи $\mu = 0$ как с наличием дополнительного взаимодействия между кварками и глюонами, так и без него [16].

Проведены исследования фосфолипидной транспортной наносистемы (ФТНС) переноса лекарств в рамках модели разделенных формфакторов с использованием метода асинхронной дифференциальной эволюции (АДЭ). Базовые параметры однослойных везикул ФТНС фитируются к экспериментальным данным малоуглового синхротронного рентгеновского рассеяния. Структура наночастиц ФТНС проанализирована в зависимости от концентрации мальтозы в воде. Численные результаты демонстрируют эффективность параллельной реализации на основе технологии MPI, а также преимущество АДЭ-подхода перед другими известными оптимизационными процедурами [17].

Предложен новый подход к полиномиальной аппроксимации (сглаживанию) высоких порядков, основанный на методе базисных элементов (МБЭ). Конструкция МБЭ-многочлена строится на трехточечной сетке и зависит от управляющих параметров x_0 , $\alpha = x_\alpha - x_0$, $\beta = x_\beta - x_0$, функционально связанных с независимой переменной $\tau = x - x_0$ правилом двойного отношения четырех точек. МБЭ-многочлен степени n определяется по четырем базисным элементам, заданным на трехточечной сетке: $x_0 + \alpha < x_0 < x_0 + \beta$, $\alpha\beta < 0$. Для вычисления коэффициентов полиномиальной модели 12-го порядка получены формулы, зависящие от длины интервала, параметров α , β и значений $f^{(m)}(x_0 + \nu)$, $\nu = \alpha, \beta, 0$, $m = \overline{0, 3}$. Применение МБЭ-многочленов высоких степеней для кусочно-полиномиальной аппроксимации функций и сглаживания экспериментальных дан-

ных повышает устойчивость и точность вычислений при увеличении шага сетки, а также понижает вычислительную сложность алгоритмов [18].

Рассмотрены две концептуальные разработки в рамках байесовского подхода к автоматическим адаптивным численным квадратурам для решения одномерных интегралов Римана (*Adam Gh., Adam S. // Springer LNCS. 2012. V.7125. P.1–16*). Во-первых, показано, что численные квадратуры, не требующие чрезмерных вычислений и минимизирующие скрытые плавающей точкой потери точности, требуют рассмотрения трех классов длины области интегрирования, когда в каждом из них применяются собственные квадратурные суммы: микроскопические (правило трапеции), мезоскопические (правило Симпсона) и макроскопические (квадратурные суммы высокой алгебраической степени точности). Во-вторых, получены точные байесовские оценки в макроскопическом диапазоне, основанные на результатах квадратур Кленшау–Кертиса [19].

В ЛИТ продолжены работы по проблеме математического описания квантовых корреляций в составных системах. Задача классификации корреляций в бинарных системах, находящихся в так называемых X -состояниях, решалась в рамках математического формализма классической теории инвариантов с применением современных систем компьютерной алгебры. Свойства квантовой запутанности смешанной 2-кубитной системы в смешанных X -состояниях анализировались в терминах локально-унитарно-инвариантных многочленов от матричных элементов матрицы плотности [20]. Исследована структура кольца инвариантных многочленов, и показано, что для X -состояний имеет место инъективный гомоморфизм фактор-кольца $SU(2) \times SU(2)$ -инвариантных многочленов по модулю его идеала сизигий и кольца $SO(2) \times SO(2)$ -инвариантов, свободно порожденного пятью многочленами степеней 1, 1, 1, 2, 2. Сепарабельные смешанные X -состояния пары кубитов были классифицированы в соответствии с вырождениями в спектре матриц плотности [21].

НАУЧНО-ПРИКЛАДНЫЕ РАБОТЫ

Сотрудниками ЛИТ и ЛФВЭ ведутся работы по исследованию характера поведения решения нелинейной краевой задачи магнитостатики в окрестности «угловой точки» (на пересечении двух сред вакуум–железо) ферромагнетика. Получена верхняя оценка допустимого роста магнитного поля в области вакуума вблизи угловой точки ферромагнетика. Показано, что при определенных условиях, налагаемых на магнитную проницаемость, магнитное поле в области вакуума вблизи угловой точки ограничено. Разработан алгоритм сгущения разностной сетки в

области с угловой точкой, который позволил существенно уменьшить время вычисления и одновременно увеличить точность решения краевой задачи. Опубликованы результаты моделирования магнитной системы, содержащей угловые точки. Рассматривались проблемы создания однородной карты поля возможных магнитных систем соленоидального типа установки NICA. Расчеты проводились с использованием двух программных продуктов: TOSCA и разработанного авторами MFC (Magnetic Field Calculation) [22].

МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО

В сотрудничестве с коллегами из ЮАР проведено исследование инклюзивной реакции $^{59}\text{Co}(p, \alpha)$ при энергии налетающих частиц 100 МэВ. Теоретический анализ, выполненный на основе статистического многоступенчатого механизма, показал, что конечной ступенью, ведущей к эмиссии α -частиц, с наибольшей вероятностью могут быть процессы подхвата (pickup) или выбивания (knockout) α -частиц. Это заключение согласуется с предшествующим исследованием реакции $^{93}\text{Nb}(p, \alpha)$. Представляет интерес исследование причин, по которым при энергии столкновения 100 МэВ происходит перемешивание процессов выбивания и подхвата, тогда как при более высоких и более низких значениях энергии доминирующим для ядра-мишени ^{93}Nb является механизм нокаута. Установлено, что объяснение наблюдаемых характеристик возможно только при сочетании обоих упомянутых конкурирующих механизмов реакции. Можно ожидать, что при более низких и более высоких значениях энергии столкновения для ^{59}Co будет наблюдаться та же тенденция, что и в случае ^{93}Nb [23].

Совместно с коллегами из научных центров США было предложено развитие системы управления потоками задач PanDA (Production and Data Analysis), позволяющей отправлять задачи на суперкомпьютер-

ные вычислительные платформы. Эта разработка была протестирована на суперкомпьютере Titan (Oak Ridge Leadership Computing Facility, USA), суперкомпьютере НИЦ «Курчатовский институт», суперкомпьютере IT4 (Острава, Чехия) и др. Проведенное тестирование показало, что возможно использовать модифицированную PanDA WMS как портал, не зависящий от вычислительной инфраструктуры, который может быть использован не только для решения ресурсоемких задач физики высоких энергий и ядерной физики, но и в других областях, таких как биоинформатика и астрофизика [24].

В 2016 г. совместно с коллегами из Китая и Франции продолжены работы по созданию распределенной вычислительной среды для эксперимента BES-III, объединяющей к настоящему времени 12 ресурсных центров из Китая, США, Италии, ОИЯИ и обеспечивающей доступ к более чем 3000 CPU ядер и 0,5 Пбайт дискового пространства. В 2016 г. более полумиллиона задач было выполнено в этой распределенной системе. В данное время распределенная система обработки данных эксперимента BES-III работает надежно и составляет значительную часть вычислительной мощности для обработки экспериментальных данных [25].

СОВЕЩАНИЯ, КОНФЕРЕНЦИИ

С 25 по 30 января в ЛИТ прошла XXIII Международная конференция «Математика. Компьютер. Образование», которая проводится с 1993 г. Она зарекомендовала себя как продуктивная форма обмена опытом между специалистами различных научных направлений — математиками, биологами, экономистами, педагогами. В конференции приняли участие около 250 человек из 32 городов России, Украины, Белоруссии, Казахстана, а также ученые из стран-участниц ОИЯИ. В рамках конференции был организован симпозиум «Биофизика сложных систем. Молекулярное моделирование. Системная биология». Заседания отдельных секций по математике, математическому моделированию и вычислительным методам, биологии, экономике, педагогике включали устные и стендовые доклады. Наряду с секционными заседаниями и круглыми столами в ходе конференции были проведены 11 мастер-классов по ознакомлению с основами современных высокоуровневых языков программирования и их применению для

моделирования при решении исследовательских задач. Конференция традиционно завершилась обсуждением работы секций и вручением грамот молодым участникам за лучшие доклады.

Традиционное, 19-е по счету, двухдневное рабочее совещание по компьютерной алгебре проходило в ЛИТ 24 и 25 мая. В нем приняли участие более 40 ученых из университетов и научных центров Бухареста (Румыния), Сент-Джорджеса (Гренада), Тбилиси (Грузия), Турку (Финляндия), Москвы, Петрозаводска, Санкт-Петербурга, Саратова, Тамбова и Дубны. Было представлено 24 доклада. Основная цель совещания — обсуждение современных методов, алгоритмов и систем компьютерной алгебры как специалистами в области информатики, так и математиками и физиками. На совещании был представлен ряд новых многообещающих результатов по развитию алгоритмов исследования и решения систем алгебраических, дифференциальных и разностных уравнений, по символично-численному моделиро-

ванию квантово-механических систем, по вычислению многопетлевых фейнмановских интегралов методами компьютерной алгебры, а также по различным приложениям компьютерной алгебры в физике и математике.

С 4 по 9 июля в ЛИТ проходила 7-я Международная конференция «Распределенные вычисления и грид-технологии в науке и образовании» (GRID'2016), которая проводится каждые два года и является традиционной для лаборатории. В 2016 г. конференция была посвящена 60-летию ОИЯИ и 50-летию образования ЛВТА/ЛИТ. Она привлекла многочисленное сообщество российских и зарубежных специалистов, готовых обсудить возникающие задачи и перспективы развития современных информационных технологий. В работе конференции приняли участие более 250 ученых из научных центров Азербайджана, Белоруссии, Болгарии, Германии, Грузии, Китая, Монголии, Румынии, Словакии, Чехии, Швеции и др. Россия была представлена участниками из более чем 30 университетов и исследовательских центров. В рамках конференции была организована работа десяти секций, на которых обсуждались вопросы, связанные с развитием

грид-технологий, гетерогенных вычислений, добровольных вычислений, облачных технологий, аналитики больших данных, а также организована школа для молодых ученых, аспирантов и студентов, где были проведены учебные курсы по гетерогенным и облачным вычислениям. Всего было представлено 35 пленарных, более 120 секционных и 43 стендовых доклада. В школе приняли участие 40 студентов и молодых ученых из Монголии, Румынии и российских университетов — МИФИ, СПбГУ, университета «Дубна».

С 24 по 28 октября в ЛИТ прошла седьмая школа по информационным технологиям «Грид и современные административно-управленческие системы», организаторами которой выступили ОИЯИ и ЦЕРН при поддержке МИФИ и Российского экономического университета им. Г.В. Плеханова. В работе школы приняли участие более 90 студентов, аспирантов и молодых ученых из ведущих вузов России и Казахстана. Студенты прослушали лекции по современным информационным технологиям ведущих специалистов ЦЕРН и ОИЯИ. По материалам лекций были организованы тренинги и конкурсы, победителям были вручены призы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Astakhov N. S., Baginyan A. S., Belov S. D. et al.* JINR Tier-1 Centre for the CMS Experiment at LHC // Part. Nucl., Lett. 2016. V. 13, No. 5. P. 1103–1107.
2. *Gavrilov V., Golutvin I., Kodolova O. et al.* Status of RDMS CMS Computing // Part. Nucl., Lett. 2016. V. 13, No. 5. P. 1108–1111.
3. *Petrosyan A. Sh.* PanDA for COMPASS at JINR // Part. Nucl., Lett. 2016. V. 13, No. 5. P. 1095–1098.
4. *Kadochnikov I., Pelevanyuk I.* JINR Tier-1 Service Monitoring System: Ideas and Design // CEUR Workshop Proc. 2016. V. 1787. P. 281–284.
5. *Korenkov V., Nechaevskiy A., Ososkov G., Pryahina D., Trofimov V., Uzhinskiy A., Voytishin N.* The JINR Tier1 Site Simulation for Research and Development Purposes // Eur. Phys. J. Web Conf. 2016. V. 108. P. 02033; doi: 10.1051/epjconf/201610802033.
6. *Korenkov V. V., Nechaevskiy A. V., Ososkov G. A., Pryahina D. I., Trofimov V. V., Uzhinskiy A. V.* Simulation Concept of NICA-MPD-SPD TIER0-TIER1 Computing Facilities // Part. Nucl., Lett. 2016. V. 13, No. 5. P. 1074–1083.
7. *Korenkov V., Nechaevskiy A., Ososkov G., Potrebennikov Yu., Pryahina D., Trofimov V., Uzhinskiy A.* Optimization of Distributed Data Processing System for NICA BM@N Experiment by Using Simulation // Procedia Comp. Science. 2016. V. 101. P. 333–340.
8. *Baranov A. V., Balashov N. A., Kutovskiy N. A., Semenov R. N.* JINR Cloud Infrastructure Evolution // Phys. Part. Nucl. Lett. 2016. V. 13, No. 5. P. 672–675; doi: 10.1134/S1547477116050071.
9. *Baranov A. V. et al.* Approaches to Cloud Infrastructures Integration // Comp. Res. Modeling. 2016. V. 8, No. 3. P. 583–590 (in Russian).
10. *Balashov N., Baranov A., Korenkov V.* Optimization of Over-Provisioned Clouds // Part. Nucl., Lett. 2016. V. 13, No. 5. P. 957–961.
11. *Filozova I. A., Bashashin M. V., Korenkov V. V., Kuniaev S. V., Musulmanbekov G., Semenov R. N., Sheshtakova G. V., Strizh T. A., Ustenko P. V., Zaikina T. N.* Concept of JINR Corporate Information System // Part. Nucl., Lett. 2016. V. 13, No. 5. P. 980–985.
12. *Bashashin M. V., Kekelidze D. V., Kostromin S. A., Korenkov V. V., Kuniaev S. V., Morozov V. V., Potrebennikov Yu. K., Trubnikov G. V., Philippov A. V.* NICA Project Management Information System // Part. Nucl., Lett. 2016. V. 13, No. 5. P. 969–973.
13. *Baranov D. et al.* // Eur. Phys. J. Web Conf. 2016. V. 108. P. 02012.
14. *Galoyan A. S., Uzhinsky V. V.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2016. V. 80. P. 333.
15. *Voytishin N. et al.* // Eur. Phys. J. Web Conf. 2016. V. 108. P. 02023.
16. *Friessen A., Kalinovsky Yu., Toneev V.* // J. Phys. Conf. Ser. 2016. V. 668, No. 1. P. 012128.
17. *Zemlyanaya E. et al.* // J. Phys. Comp. Simulations. 2016. V. 724. P. 012056.
18. *Dikusar N. D.* // Math. Models and Comp. Simulations. 2016. V. 8, No. 2. P. 183–200.
19. *Adam Gh., Adam S.* <http://dx.doi.org/10.1051/epjconf/201610802002>. 2016.

20. Gerdt V., Khvedelidze A., Palii Yu. On the Ring of Local Unitary Invariants for Mixed X -States of Two Qubits // Zap. Nauchn. Sem. POMI. 2016. V.448. P.107–123.
21. Khvedelidze A., Torosyan A. Spectrum and Separability of Mixed 2-Qubit X -States // Zap. Nauchn. Sem. POMI. 2016. V.448. P.270–285.
22. Perepelkin E. E. et al. // Part. Nucl., Lett. 2016. V. 13, No.6(204). P.1168–1174.
23. Cowley A. et al. // Phys. Rev. C. 2016. V.93. P.034624.
24. De K., Jha S., Klimentov A.A., Maeno T., Mashinistov R.Yu., Nilsson P., Novikov A.M., Oley-
nik D.A., Panitkin S.Yu., Poyda A.A., Read K.F., Ryabinkin E.A., Teslyuk A.B., Velikhov V.E., Wells J.C., Wenaus T. Integration of PanDA Workload Management System with Supercomputers // Part. Nucl., Lett. 2016. V.13, No.5. P.1010–1019.
25. Belov S.D., Deng Z.Y., Korenkov V.V., Li W.D., Lin T., Ma Z.T., Nicholson C., Pelevanyuk I.S., Suo B., Trofimov V.V., Tsaregorodtsev A.U., Uzhinskiy A.V., Yan T., Yan X.F., Zhang X.M., Zhemchugov A.S. BES-III Distributed Computing Status // Part. Nucl., Lett. 2016. V.13, No.5. P.1084–1088.